s-d相互作用と異常グリーン関数法

AUTHOR(S):

中嶋, 貞雄

sd相互作用と異常グリーン関数法

物性研　　中嶋貞雄

（5月27日受理）

§1

超電導に関するGorkovの方法をまねて，sd相互作用の問題を異常グリーン関数を使って解くことは，最初Takano－Ogawa[1]によって試みられ，さらにAbrikosov[2]はこれにmost divergent vertex correctionを加えることを試みた。えられる結果はYosida理論[3]に似ているが，多少のちがい（あとで示すように原理上は重要なちがい）があり，また方法そのものの基礎づけもあいまいである。

このノートの目的は次のふたつの点を示すことにある：　i）Takano－Ogawa－Abrikosovの方法を基礎づけることは可能である。　ii）正しい基礎づけから出発すると，Yosida理論とのくいちがいを解消することができる。

ただし話は絶対零度にかぎる。

§2

Abrikosovにしたがって局在スピンをFermiオペレータであらわし，全系のハミルトニヤンを次のように書く。

$$\mathcal{H} = \sum_{k,\alpha} \epsilon_k c^+_{k\alpha} c_{k\alpha} - \frac{J}{N} \sum (\vec{S}_{\beta\beta'} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha'})\, c^+_{k\alpha} a^+_{\beta} a_{\beta'} c_{k'\alpha'} \quad (1)$$

ここに ϵ_k はふつうの意味でのバンド・エネルギー（たとえば $k^2/2m^*$）である。なお局在スピンの大きさは½としておく，a, a^+ で記述されるFermi粒子をかりにスピノンとよぼう。スピノンが1ケあるヒルベルト空間において(1)はふつうのsd相互作用のハミルトニヤンに等価である。われわれはスピノンの真空，スピノンが2ケ存在するヒルベルト空間もつけ加えて考える。これらの空間では，(1)は電子ガスのハミルトニヤンに帰着してしまう。

さて，電子がNケ，スピノンが0ケの部分空間における（1）の基底状態を$\Phi_0 = \Phi(N, 0)$とかくと，そのエネルギー固有値$E_0(N)$は，Nケの電子からなる電子ガスの最低エネルギーである。電子（N+1）ケ，スピノン1ケのばあいの基底状態を$\Phi_1 = \Phi(N+1, 1)$とかくと，そのエネルギー固有値$E(N+1)$は，電子がN+1ケあるばあいの，ふつうのsdハミルトニヤンの最低エネルギーである。

$$E(N+1) = E(N+1) - E_0(N+1) + E_0(N+1) - E_0(N) + E_0(N)$$
$$\cong E_0(N) + \varepsilon_F + \Delta E \tag{2}$$

と書こう。ただし

$$\varepsilon_F = \frac{\partial E_0(N)}{\partial N}, \qquad \Delta E = E(N+1) - E_0(N+1) \tag{3}$$

はそれぞれ電子ガスにおける電子の化学ポテンシャル，およびsd相互作用によるエネルギーシフトである。以下$\Delta E < 0$と仮定しよう。sd相互作用を考えに入れても，電子の化学ポテンシャルはN^{-1}のオーダしか変化しないことに注意しておこう：

$$\mu = \frac{\partial E(N+1)}{\partial N} = \varepsilon_F \left[1 + 0\left(\frac{1}{N}\right) \right] \tag{4}$$

さて，超電導のばあいには2N電子系の基底状態と2N+2電子系の基底状態とは，一電子エネルギーを化学ポテンシャルを原点として測っておけば，縮退しており，これらの状態の一次結合をとることによって，Gorkovの異常グリーン関数を導入する可能性が生じた。いまの問題では，一電子エネルギーを

$$\xi_k = \varepsilon_k - \varepsilon_F \tag{5}$$

とシフトさせただけでは，Φ_0とΦ_1との間になおΔEだけのエネルギー差がある。そこで，スピノンがΔEだけの化学ポテンシャルをもつとしよう。つまり（1）の代りに

$$\tilde{\mathscr{H}} = \Sigma\ \xi_k\ c^+_{k\alpha}\ c_{k\alpha} - \varDelta E\ \Sigma\ a^+_\beta\ a_\beta$$

$$- \frac{J}{N}\ \Sigma\ (\vec{s}_{\beta\beta'} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha'})\ c^+_{k\alpha}\ a^+_\beta\ a_{\beta'}\ c_{k'\alpha'} \tag{6}$$

をとろう。すると

$$\tilde{\mathscr{H}}\ \Phi_0 = (E_0(N) - N\ \varepsilon_F)\ \Phi_0$$

$$\tilde{\mathscr{H}}\ \Phi_1 = (E_0(N) + \varepsilon_F + \varDelta E - (N+1)\ \varepsilon_F - \varDelta E)\ \Phi_1$$

$$= (E_0(N) - N\ \varepsilon_F)\ \Phi_1$$

となって，Φ_0 と Φ_1 とが縮退する。これにたいしてスピノンが２ケある状態は $-\varDelta E$ だけエネルギーが高くなるから，考える必要がない。

そこで一次結合

$$\Phi = \eta\ \Phi_0 + \sqrt{1-\eta^2}\ \Phi_1 \tag{7}$$

をとろう。すると

$$\langle \Phi |\ a_\beta\ c_{k\alpha}\ | \Phi \rangle = \eta \sqrt{1-\eta^2}\ \ \langle \Phi_0 |\ a_\beta\ c_{k\alpha}\ | \Phi_1 \rangle$$

$$= \eta \sqrt{1-\eta^2}\quad \Gamma_{k\alpha\beta} \tag{8}$$

$\Gamma_{k\alpha\beta}$ は Yosida 理論にあらわれる一次結合の係数とみることができる。ハミルトニヤンも反交換関係も，位相変換

$$a_\beta \rightarrow (-1)\ a_\beta, \qquad a^+_\beta \rightarrow (-1)\ a^+_\beta \tag{9}$$

にたいし不変であり，他方

$$\Phi_0 \rightarrow \Phi_0, \quad \Phi_1 \rightarrow -\Phi_1 \tag{10}$$

である。したがって対称性からすれば (7) のような一次結合をとるべき理由はないのであって，(7) はひとつの broken symmetfy をあらわしている。もし，これが気に入らなければ，あとで $\eta \rightarrow 0$ の極限をとればよい。

§3

さて Heisenberg 表示を

$$c_{k\alpha}(t) = e^{i\tilde{\mathcal{H}}t} c_{k\alpha} e^{-i\tilde{\mathcal{H}}t}$$
$$a_{\beta}(t) = e^{i\tilde{\mathcal{H}}t} a_{\beta} e^{-i\tilde{\mathcal{H}}t} \tag{11}$$

で定義し，

$$G(k\alpha t;\ k'\alpha' t') = \langle \Phi | T\ c_{k\alpha}(t)\ c^{+}_{k'\alpha'}(t') | \Phi \rangle \tag{12}$$

$$F(\beta t;\ k'\alpha' t') = \langle \Phi | T\ a^{+}_{\beta}(t)\ c^{+}_{k'\alpha'}(t') | \Phi \rangle \tag{13}$$

とおこう。Tは時間的な順序づけを意味する（cとaとは反可換としておこう）。たとえば t＞t′として

$$F(\beta t;\ k'\alpha' t') = \eta\sqrt{1-\eta^2} \langle \Phi_1 | a^{+}_{\beta}\ e^{i(\tilde{E}-\tilde{H})(t-t')}\ c^{+}_{k'\alpha'} | \Phi_0 \rangle \tag{14}$$

ただし $\tilde{E} = E_0(N) - N\varepsilon_F$。$\Phi_0$ と Φ_1 とが $\tilde{\mathcal{H}}$ に関して縮退しているからこそ（14）が t－t′の関数になるのであって，（6）の ΔE に比例する項がなければ，（14）は exp（$+\Delta E$ t）だけ余分の因子をもつ。この因子を落したことが，Takano－Oguwa－Abrikosov のまちがいであり，Yosida 理論とのくいちがいもここに起因する。

グリーン関数のフーリェ変換と

$$G(k\alpha t; k'\alpha' t') = i\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} G(k\alpha;\ k'\alpha';\ \omega) \times e^{-i\omega(t-t')} \tag{15}$$

で定義しよう。sd 相互作用による化学ポテンシャルのシフトが無視できる（（4）をみよ）ことに注意すると，G(ω) の ω に関する解析性は，ふつうのばあいと同じであることが容易にわかる。F についても同様である。

はじめに，超電導のばあいの Gorkov とそのまままねてみよう。

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \xi_k \right] G(k\alpha t\,;\,k'\alpha'\beta') - i\delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'}\delta(t-t')$$

$$= \frac{J}{N} \Sigma\, \vec{s}_{\beta\beta'} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha''} < T\, c_{k''\alpha''}(t)\, a_{\beta'}(t)\, a^{+}_{\beta}(t)\, c^{+}_{k'\alpha'}(t') >$$

$$\cong \sum_{\beta} \Delta(\alpha\beta)\, F(\beta t\,;\,k'\alpha' t') \qquad (16)$$

ただし

$$\Delta(\alpha\beta) = \frac{J}{N} \Sigma\, \vec{s}_{\beta\beta''} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\alpha''} < c_{k''\alpha''}\, a_{\beta''} > \qquad (17)$$

同様に

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \Delta E \right] F(\beta t\,;\,k'\alpha' t') \qquad (18)$$

$$\cong \sum_{\alpha} \sum_{k} \Delta^{*}(\alpha\beta)\; G(k\alpha t\,;\,k'\alpha' t')$$

$$\Delta^{*}(\beta\alpha) = \frac{J}{N}\; \Sigma < a^{+}_{\beta''}\, c^{+}_{k''\alpha''} > \vec{s}_{\beta''\beta} \cdot \vec{\sigma}_{\alpha'\alpha} \qquad (19)$$

もちろん

$$< a^{+}_{\beta''}\, c^{+}_{k''\alpha''} > = F(\beta'' t+0\,;\,k''\alpha'' t)$$

$$= i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi}\, F(\beta''\,;\,k''\alpha''\,;\,\omega) \qquad (20)$$

フーリェ変換して

$$G(k\alpha\,;\,k'\alpha'\,;\,\omega) = \frac{1}{\omega - \xi_k + i0^{+}\,\mathrm{sgn}\,\xi_k} \left[\delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'} \right.$$

$$\left. + \sum_{\beta} \Delta(\alpha\beta)\, F(\beta\,;\,k'\alpha'\,;\,\omega) \right] \qquad (21)$$

$$F(\beta\,;\,k'\alpha'\,;\,\omega) = \frac{1}{\omega - \Delta E - i0^{+}} \sum_{k\alpha} \Delta^{*}(\alpha\beta)\, G(k\alpha\,;\,k'\alpha'\,;\,\omega) \qquad (22)$$

いま $\eta \to 0$ の極限をとることに予想すれば，（22）を Δ に関して一次，つまり右辺の G に（21）の右辺第一項を代入したもの，をとればよい。よって

$$F(\beta;k'\alpha') \cong \frac{\Delta^{*}(\alpha'\beta)}{(\omega-\Delta E-i0^{+})\,(\omega-\xi'+i0^{+}\mathrm{sgn}\,\xi')} \tag{23}$$

(20)，(23) を (19) に代入する。

$$\Delta^{*}(\beta\alpha) = \frac{J}{N}\sum \vec{s}_{\beta''\beta}\cdot\vec{\sigma}_{\alpha''\alpha}\;\Delta^{*}(\alpha''\beta'')\;\times$$
$$\times\;\rho\int_{-D}^{D} d\xi''\int_{-\infty}^{\infty}\frac{i\,d\omega}{2\pi}\cdot\frac{1}{(\omega-\Delta\varepsilon-i0^{+})\,(\omega-\xi''+i0^{+}\mathrm{sgn}\,\xi'')}$$

ただし，例によって状態密度は $-D<\xi<D$ で一定値 ρ をとるとする。積分を遂行して

$$\Delta^{*}(\beta\alpha) = \frac{J\rho}{N}\log\left(\frac{D}{-\Delta E}\right)\cdot\sum\Delta^{*}(\beta''\alpha'')\,\vec{s}_{\beta''\beta}\cdot\vec{\sigma}_{\alpha''\alpha} \tag{24}$$

これは lowest order の Yosida 理論にほかならない。

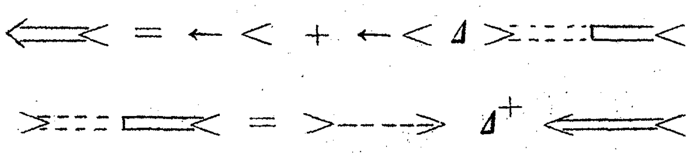
§4

ノーマル・タイプの自己エネルギーは無視して，G，F にたいする Dyson 方程式は，一般に次の形をとる；

$$[\omega-\xi_{k}]\,G(k\alpha;\,k'\alpha';\,\omega)$$
$$=\delta_{kk'}\,\delta_{\alpha\alpha'} + \sum_{\beta}\Delta(\alpha\beta;\omega)\,F(\beta;k'\alpha';\omega) \tag{25}$$

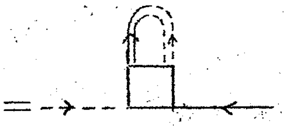
$$[\omega-\Delta E]\,F(\beta;\,k'\alpha')$$
$$=\sum_{k\alpha}\Delta^{+}(\beta\alpha;\omega)\,G(k\alpha;k'\alpha';\omega) \tag{26}$$

グラフで書く



Δ，Δ^{+} をセルフコンシステントにきめる式は，Abrikosov も指摘している

とおり

$$--\to \varDelta^{+} \leftarrow \quad =$$  (27)

ここに四形の箱は four vertex function であって，平行に走る実線と点線を一組切っても分解しない，という意味で既約である。この four vertex として裸の sd 相互作用をとったものが Takano — Oguwa 理論であり，Abrikosov は most divergent vertex correction を加えた。筆者の前論文[4)]にしたがって，most divergent part を I とかくことにしよう。ただし，スピノンに化学ポテンシャル $\varDelta E$ を与えてあるので，(27) は次の形になる。

$$\varDelta^{+}(\beta\alpha\,;\omega) = i\rho\int_{-D}^{D} d\xi' \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega'}{2\pi}\sum_{\beta'\alpha'} F(\beta'\,;k'\alpha'\,;\omega')$$
$$\times\, I(\alpha'\beta'\,;\alpha\beta\,;\omega+\omega'-\varDelta E-i0^{+}) \tag{28}$$

ただし

$$I(z) = \left(\frac{J}{N}\right)\frac{\left[\left(1+\frac{J}{N}\phi(z)\right)\vec{\sigma}\cdot\vec{s}-\left(\frac{3J}{4N}\right)\phi(z)\right]}{\left[1+\frac{2J}{N}\phi(z)\right]} \tag{29}$$

$$\phi(z) = \rho \log\left[\frac{z+D}{z}\right] \tag{30}$$

ふたたび F を $\varDelta$ について一次の近似でもとめると，(25)，(26) により

$$F(\beta\,;k\alpha\,;\omega) = \frac{\varDelta^{+}(\beta\alpha\,;\omega)}{(\omega-\varDelta E-i0^{+})\,(\omega-\xi_k+i0^{+}\mathrm{sgn}\,\xi_k)} \tag{31}$$

これを (28) に代入して $\varDelta E$ をきめる永年方程式がえられる。まず ξ' 積分をやってしまうと

$$\int_{-D}^{D}\frac{d\xi'}{\omega'-\xi'+i0^{+}\mathrm{sgn}\,\xi'} = \log\left(\frac{\omega+D-i0^{+}}{\omega-i0^{+}}\right)-\log\left(\frac{\omega-D+i0^{+}}{\omega+i0^{+}}\right) \tag{32}$$

つぎに ω' について積分するのであるが，$\Delta^+(\omega)$ は ω 平面上の下半面において解析的と仮定して積分路を下半面で閉じる。すると（32）の右辺第二項の切断に沿って積分にひとしくなり，

$$\Delta^+(\beta\alpha\,;\omega)=\rho\int_0^D d\omega'\sum\frac{\Delta^+(\beta'\alpha'\,;\omega')}{(\omega'-\Delta E)}\times \times\, I(\alpha'\beta'\,;\alpha\beta\,;\omega+\omega'-\Delta E) \tag{33}$$

$$\psi^+(\beta\alpha\,;\omega)=\frac{\Delta^+(\beta\alpha\,;\omega)}{\omega-\Delta E} \tag{34}$$

とおくと

$$(\omega-\Delta E)\,\psi^+(\beta\alpha\,;\omega) =\rho\int_0^D d\omega'\sum\psi^+(\beta'\alpha'\,;\omega')\,I(\alpha'\beta'\,;\alpha\beta\,;\omega+\omega'-\Delta E) \tag{35}$$

これは Yoshimori 方程式[5]と同じ形である。もっとも，Yoshimori 方程式は運動量空間で書かれているのにたいし，（35）はエネルギー ω を変数として書かれている。

§5

以上のように，異常グリーン関数を使う方法と Yosida 理論との関係は明らかになったわけである。異常グリーン関数の立場からみると，Yosida 理論は（7）のように対称性を破るパラメタ η を導入しておいて，あとで $\eta\to 0$ の極限をとる（つまり異常グリーン関数 F について一次），というふうにみなせるであろう。局在スピンで書いた，もともとの sd ハミルトニヤンとの同等性を固執すれば，$\eta\to 0$ の極限をとることは当然とおもわれる。しかし，そうだとすると，異常グリーン関数の導入は数学的方便にすぎないことになるわけである。

References

1) F. Takano and T. Ogawa, Prog. Theor. Phys. 35, 343, 1966.

2) A. A. Abrikosov, JETP 53, 1078, 1967.

3) K. Yosida, Phys. Rev. 147, 223, 1966; 物性 vol. 9, 169, 1968,

4) S. Nakajima, Prog. Theor. Phys. to be published.

5) A. Yoshimori, Phys. Rev. to be published.